

ادامه فصل سوم

بستگی بلور و ثابت های گنساننی

۱- ثابتهای تعادلی شبکه

۲- انرژی چسبندگی

۳- بلورهای یونی

۴- انرژی مادلونگ یا الکتروستاتیکی

۵- بلورهای کووالانسی

۶- فلزها

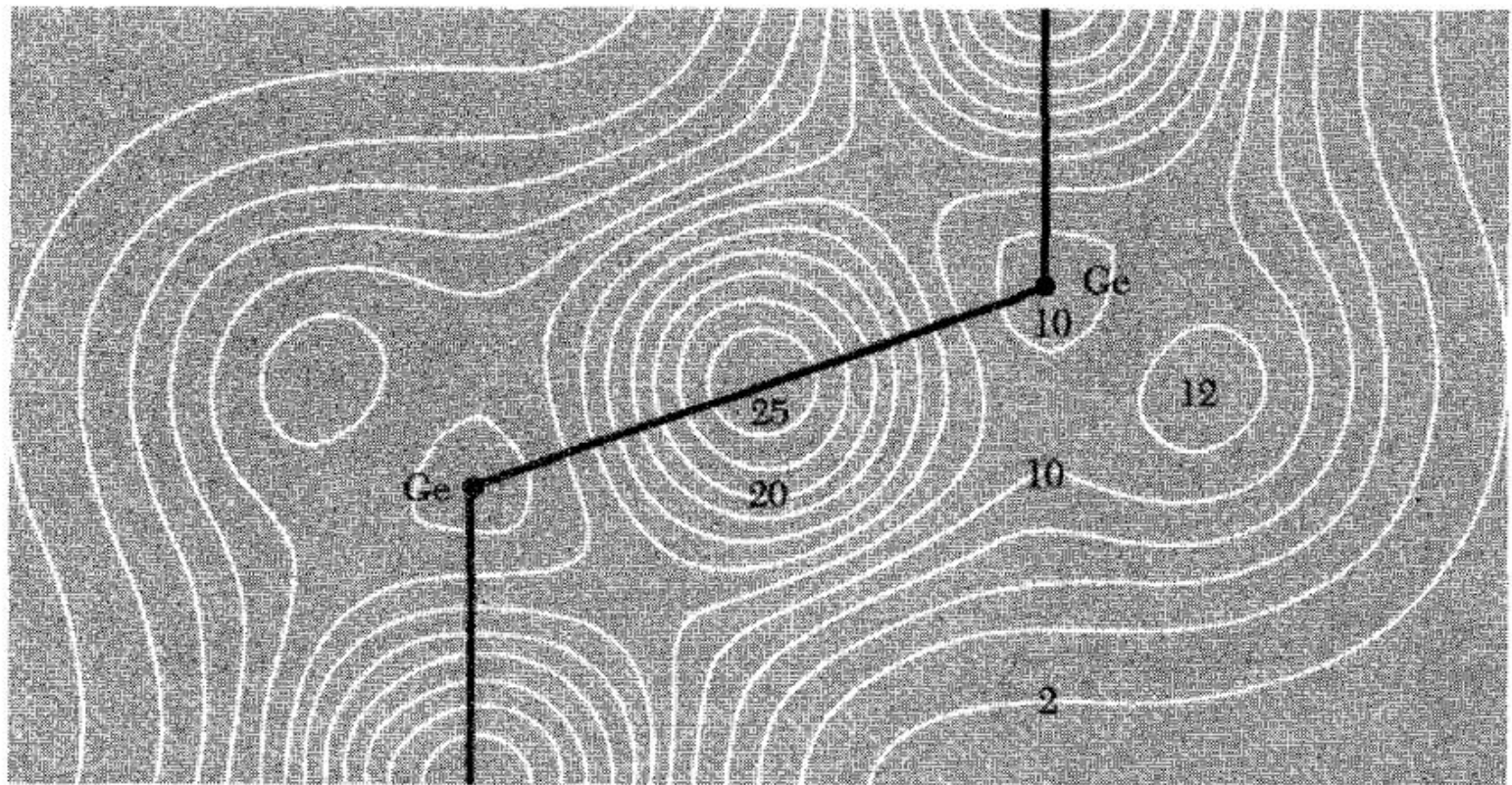
۷- پیوندهای هیدروژنی

بلورهای کووالانسی

پیوند کووالانسی، زوج الکترون مرسوم یا پیوند هم‌قطب در شیمی، به‌ویژه در شیمی آلی است. این پیوند قوی است: پیوند بین دو اتم کربن در الماس نسبت به اتمهای مجزای خنثی با استحکام پیوند در بلورهای یونی مقایسه‌پذیر است.

پیوند کووالانسی معمولاً از دو الکترون تشکیل شده است، که هر یک به یکی از اتمهای شرکت‌کننده در پیوند مربوط می‌شوند. الکترونهايي که این پیوند را تشکیل می‌دهند، مایل‌اند تا حدی در ناحیه بین دو اتمی که از طریق پیوند به هم متصل شده‌اند، جایگزیده شوند. اسپینهای دو الکترون این پیوند پادموازی‌اند.

پیوند کووالانسی ویژگیهای راستایی قوی دارد (شکل ۱۱). کربن، سیلیسیم، و ژرمانیم دارای ساختار الماسی‌اند، در آنها هر اتم تحت زوایای چهاروجهی به چهار همسایه اول خود اتصال دارد، چنین آرایش کسر کوچکی از فضای موجود را پر می‌کند، 34° در مقایسه با 74° ساختار تنگ‌چین. پیوند چهاروجهی تنها چهار همسایه اول را می‌پذیرد، در حالی که ساختار تنگ‌چین ۱۲ همسایه اول دارد. بر تشابه پیوند کربن و سیلیسیم نباید بیش از حد تأکید کرد. کربن زیست‌شناسی را می‌دهد، ولی سیلیسیم زمین‌شناسی و فناوری نیم‌رسانا را.



شکل ۱۱. غلظت الکترون ظرفیتی محاسبه شده در ژرمانیم. رقمهای روی پربندها غلظت الکترونی یک یاخته بسیط با چهار الکترون ظرفیتی به ازای هر اتم (۸ الکترون در یاخته بسیط) را می دهد. به غلظت زیاد در نیمه راه راستی پیوند Ge-Ge توجه کنید، این همان چیزی است که از پیوند کووالانسی انتظار می رود.

عناصر C، Si، و Ge نسبت به پوسته‌های پر چهار الکترون کم دارند، و بنابراین، این عناصر (برای مثال) می‌توانند در اثر همپوشانی بارها برهم‌کنش جاذب داشته باشند. پیکربندی الکترونی کربن $1s^2 2s^2 2p^2$ است. برای تشکیل دستگاه چهاروجهی از پیوندهای کووالانسی، اتم کربن باید نخست به پیکربندی الکترونی $1s^2 2s^2 2p^3$ ارتقا یابد. این ارتقا از حالت پایه به $4eV$ انرژی نیاز دارد که بیش از مقداری است که هنگام تشکیل پیوندها بازیافت می‌شود.

گستره پیوسته‌ای از بلورها بین دو حد یونی و کووالانسی قرار دارند. غالباً این برآورد مهم است که یک پیوند معین تا چه حد یونی یا کووالانسی است. ج. س. فیلیپس با موفقیت چشمگیری نظریه نیمه تجربی تعیین نهاد کسری یونی یا کووالانسی پیوند در بلور دی‌الکتریک را تعمیم داده است (جدول ۸).

جدول ۸. نهاد کسری یونی پیوندها در بلورهای دوعنصری

نهاد کسری یونی	بلور	نهاد کسری یونی	بلور
		۰٫۰۰	Si
۰٫۳۱	GaAs	۰٫۱۸	SiC
۰٫۲۶	GaSb	۰٫۰۰	Ge
۰٫۸۶	AgCl	۰٫۶۲	ZnO
۰٫۸۵	AgBr	۰٫۶۲	ZnS
۰٫۷۷	AgI	۰٫۶۳	ZnSe
۰٫۸۴	MgO	۰٫۶۱	ZnTe
۰٫۷۹	MgS	۰٫۷۹	CdO
۰٫۷۹	MgSe	۰٫۶۹	CdS
		۰٫۷۰	CdSe
۰٫۹۲	LiF	۰٫۶۷	CdTe
۰٫۹۴	NaCl		
۰٫۹۶	RbF	۰٫۴۲	InP
		۰٫۳۶	InAs
		۰٫۳۲	InSb

با اقتباس از: J. C. Phillips, *Bonds and bands in semiconductors*.

فلزها

فلزها با رسانایی الکتریکی زیاد مشخص می‌شوند، و در فلز تعداد زیادی، معمولاً یک یا دو، الکترون به‌ازای هر اتم آزادانه به اطراف حرکت می‌کنند. الکترونی‌هایی که برای حرکت در دسترس‌اند، الکترونی‌های رسانشی نامیده می‌شوند. الکترونی‌های ظرفیتی اتم، الکترونی‌های رسانشی فلز می‌شوند.

در برخی از فلزها، برهم‌کنش مغزهای یونی با الکترونی‌های رسانشی، همواره سهم عمده‌ای از انرژی بستگی را تشکیل می‌دهد، ولی سیمای مشخصه بستگی فلزی پایینتر بودن انرژی الکترونی‌های ظرفیتی فلز در مقایسه با اتم آزاد است.

انرژی بستگی بلور فلز قلیایی از انرژی بستگی بلور هالید قلیایی بسیار کمتر است؛ پیوندی که الکترون

رسانشی تشکیل می‌دهد، خیلی قوی نیست. در فلزهای قلیایی، فاصله‌های بین اتمی نسبتاً بزرگ‌اند، زیرا انرژی جنبشی الکترونی‌های رسانشی برای فاصله‌های بین اتمی بزرگ، کمتر می‌شود. این امر به ایجاد بستگی ضعیف منجر می‌شود. فلزها گرایش به آن دارند که در ساختارهای نسبتاً تنگ‌چین fcc ، hcp ، bcc ، و برخی ساختارهای نزدیک به اینها متبلور شوند، و نه در ساختارهای واژچینی چون الماس.

در فلزهای واسط بستگی اضافی‌ای وجود دارد که از پوسته‌های الکترونی درونی ناشی می‌شود. فلزهای واسط و فلزهایی که در جدول دوره‌ای بلافاصله بعد از آنها قرار گرفته‌اند، دارای پوسته‌های الکترونی d بزرگ‌اند و با انرژی بستگی زیاد مشخص می‌شوند.

جدول ۱. انرژیهای چسبندگی

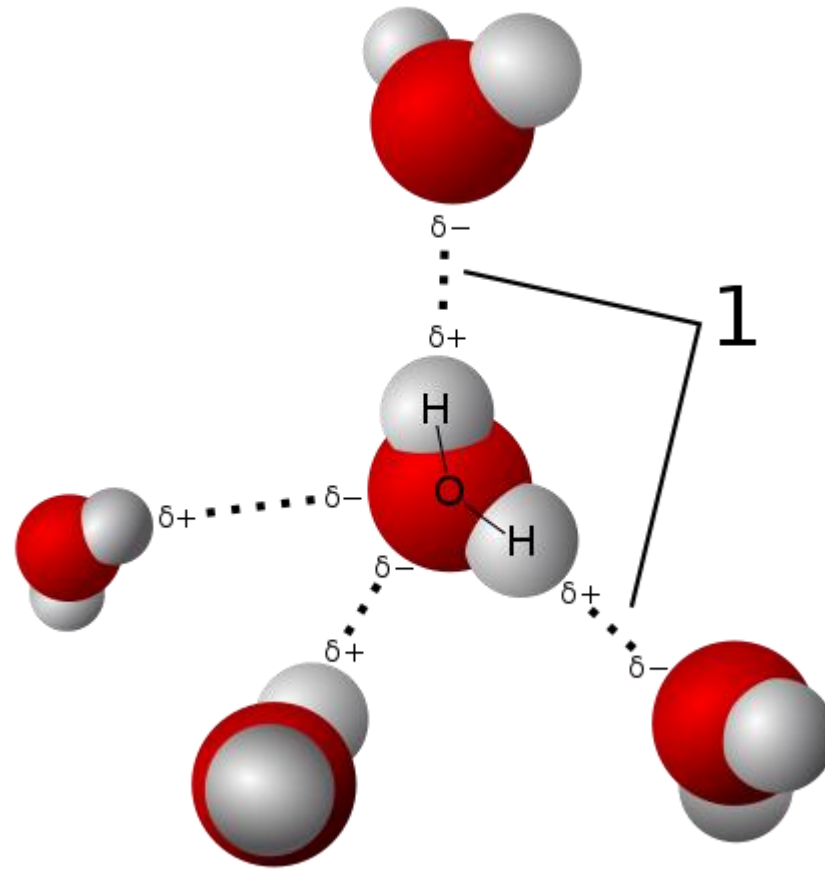
انرژی لازم برای تشکیل اتمهای سبزان نشتی در حالت الکترونی پدید از جمله‌ای در K^* و در $atom$.

Li 156 63 37.7	Be 320 3.32 76.5											B 561 5.81 134	C 711 7.37 170	N 474 4.92 113.4	O 251 2.50 60.03	F 81.0 0.84 19.37	Ne 1.92 3.020 3.46																												
Na 107 1.113 25.67	Mg 145 1.51 34.7	\longleftrightarrow kJ/mol \longleftrightarrow \longleftrightarrow eV/atom \longleftrightarrow \longleftrightarrow kcal/mol \longleftrightarrow										Al 327 3.39 78.1	Si 446 4.63 106.7	P 331 3.43 79.16	S 275 2.36 66.75	Cl 135 1.40 32.2	Ar 7.74 0.040 1.85																												
K 90.1 0.934 21.54	Ca 178 1.84 42.5	Sc 375 3.90 89.9	Ti 408 4.85 111.8	V 512 5.31 122.4	Cr 396 4.10 94.5	Mn 282 2.92 67.4	Fe 413 4.28 98.7	Co 424 4.39 101.3	Ni 426 4.44 102.4	Cu 336 3.49 80.4	Zn 130 1.35 31.04	Ga 271 2.81 64.8	Ge 372 3.85 98.8	As 235.3 2.96 68.2	Se 237 2.46 56.7	Br 113 1.22 28.18	Kr 11.2 3.116 2.68																												
Rb 82.2 0.852 19.64	Sr 166 1.72 39.7	Y 422 4.37 103.8	Zr 603 6.25 144.2	Nb 730 7.57 174.5	Mo 658 6.82 157.2	Tc 561 5.85 156	Ru 650 6.74 155.4	Rh 554 5.75 132.5	Pd 376 3.89 89.8	Ag 284 2.95 68.0	Cd 112 1.15 26.73	In 243 2.52 58.1	Sn 303 3.14 72.4	Sb 255 2.75 63.4	Te 211 2.19 50.34	I 107 1.11 25.62	Xe 15.9 3.16 3.80																												
Cs 77.8 0.804 18.54	Ba 183 1.80 43.7	La 431 4.47 103.1	Hf 621 6.44 148.4	Ta 782 8.10 186.0	W 659 6.90 205.2	Re 775 8.03 185.2	Os 788 8.17 188.4	Ir 670 6.94 160.1	Pt 564 5.84 134.7	Au 369 3.81 87.96	Hg 65 0.67 15.5	Tl 182 1.88 43.4	Pb 196 2.03 46.78	Bi 210 2.18 50.2	Po 144 1.50 34.6	At	Rn 19.5 6.203 4.56																												
Fr	Ra 160 1.66 38.2	Ac 413 4.25 58	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tbody> <tr> <td>Ce 417 4.32 99.7</td> <td>Pr 357 3.76 85.3</td> <td>Nd 326 3.43 78.5</td> <td>Pm</td> <td>Sm 206 2.14 49.3</td> <td>Eu 179 1.86 42.8</td> <td>Gd 400 4.14 95.5</td> <td>Tb 391 4.05 93.4</td> <td>Dy 294 3.04 73.2</td> <td>Ho 302 3.14 72.3</td> <td>Er 317 3.29 75.3</td> <td>Tm 233 2.42 55.8</td> <td>Yb 154 1.60 37.1</td> <td>Lu 428 4.43 102.2</td> </tr> <tr> <td>Th 596 6.20 142.9</td> <td>Pa</td> <td>U 536 5.55 128</td> <td>Np 456 4.73 109</td> <td>Pu 347 3.60 83.0</td> <td>Am 264 2.73 63</td> <td>Cm 385 3.99 92.1</td> <td>Bk</td> <td>Cf</td> <td>Es</td> <td>Fm</td> <td>Md</td> <td>No</td> <td>Lr</td> </tr> </tbody> </table>															Ce 417 4.32 99.7	Pr 357 3.76 85.3	Nd 326 3.43 78.5	Pm	Sm 206 2.14 49.3	Eu 179 1.86 42.8	Gd 400 4.14 95.5	Tb 391 4.05 93.4	Dy 294 3.04 73.2	Ho 302 3.14 72.3	Er 317 3.29 75.3	Tm 233 2.42 55.8	Yb 154 1.60 37.1	Lu 428 4.43 102.2	Th 596 6.20 142.9	Pa	U 536 5.55 128	Np 456 4.73 109	Pu 347 3.60 83.0	Am 264 2.73 63	Cm 385 3.99 92.1	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
Ce 417 4.32 99.7	Pr 357 3.76 85.3	Nd 326 3.43 78.5	Pm	Sm 206 2.14 49.3	Eu 179 1.86 42.8	Gd 400 4.14 95.5	Tb 391 4.05 93.4	Dy 294 3.04 73.2	Ho 302 3.14 72.3	Er 317 3.29 75.3	Tm 233 2.42 55.8	Yb 154 1.60 37.1	Lu 428 4.43 102.2																																
Th 596 6.20 142.9	Pa	U 536 5.55 128	Np 456 4.73 109	Pu 347 3.60 83.0	Am 264 2.73 63	Cm 385 3.99 92.1	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																

پیوندهای هیدروژنی

چون هیدروژن خنثی تنها دارای یک الکترون است، باید فقط با یک اتم دیگر پیوند کووالانسی تشکیل دهد. ولی معلوم شده است که تحت شرایط معمولی یک اتم هیدروژن توسط نیروهای نسبتاً قوی به دو اتم دیگر جذب می‌شود، و در نتیجه بین آن دو پیوندی با انرژی 1eV تشکیل می‌دهد که به پیوند هیدروژنی موسوم است. پیوند هیدروژنی بین الکترونگاتیوترین اتمها، به ویژه F، O، و N تشکیل می‌شود پیوند هیدروژنی بخش مهمی از برهم‌کنش بین مولکولهای H_2O را تشکیل می‌دهد، و همراه با جاذبه الکتروستاتیکی گشتاورهای دوقطبی الکتریکی باعث ویژگیهای فیزیکی جالب توجه آب و یخ است. این پیوند در برخی بلورهای فروالکتریک و در DNA اهمیت دارد.

پیوند هیدروژنی در آب



چکیده

- برهم‌کنش وان دروالس (برهم‌کنش القاشدهٔ دوقطبی-دوقطبی) بلورهای اتمهای گاز بی‌اثر را مقید می‌کند. این برهم‌کنش به صورت $1/R^6$ با فاصله تغییر می‌کند.
- برهم‌کنش دفعی بین اتمها عموماً از دافعهٔ الکتروستاتیکی توزیعیهای بار همپوشان و اصل پاؤلی ناشی می‌شود. این اصل الکترونیهای با اسپین موازی همپوشان را وادار می‌کند تا به اوربیتالهای با انرژی بالاتر بروند.
- بلورهای یونی در اثر جاذبهٔ الکتروستاتیکی یونهای با بار مخالف مقیدند. انرژی الکتروستاتیکی ساختاری متشکل از $2N$ یون با بار $\pm q$ برابر است با

$$(CGS) \quad U = -N\alpha \frac{q^2}{R} = -N \sum \frac{(\pm)q^2}{r_{ij}}$$

که در آن α ثابت مادلونگ و R فاصله تا همسایهٔ اول است.

- فلزها به واسطهٔ کاهش انرژی جنبشی الکترونیهای ظرفیتی در فلز، در مقایسه با انرژی آنها در اتم آزاد، مقیدند.

- پیوند کووالانسی با همپوشانی توزیعیهای بار الکترونیهای با اسپینهای پادموازی مشخص می‌شود. برای اسپینهای پادموازی، سهم پاؤلی در دافعه کم می‌شود، و این امر امکان همپوشانی از درجهٔ بزرگتری را میسر می‌سازد. الکترونیهای همپوشان، مغزهای یونی وابسته به خود را با جاذبهٔ الکتروستاتیکی به یکدیگر مقید می‌کنند.

فصل چهارم

فونونها (1). ارتعاشهای بلوری

۱- ارتعاشهای بلوری با پایه تک اتمی

۲- سرعت گروه






۳- دو اتم در پایه بسیط

۴- کوانتش امواج کشسان

۵- تکانه فونون

۶- پراکندگی ناکشسان توسط فونونها

برانگیختگی های بنیادی مهم در جامدات

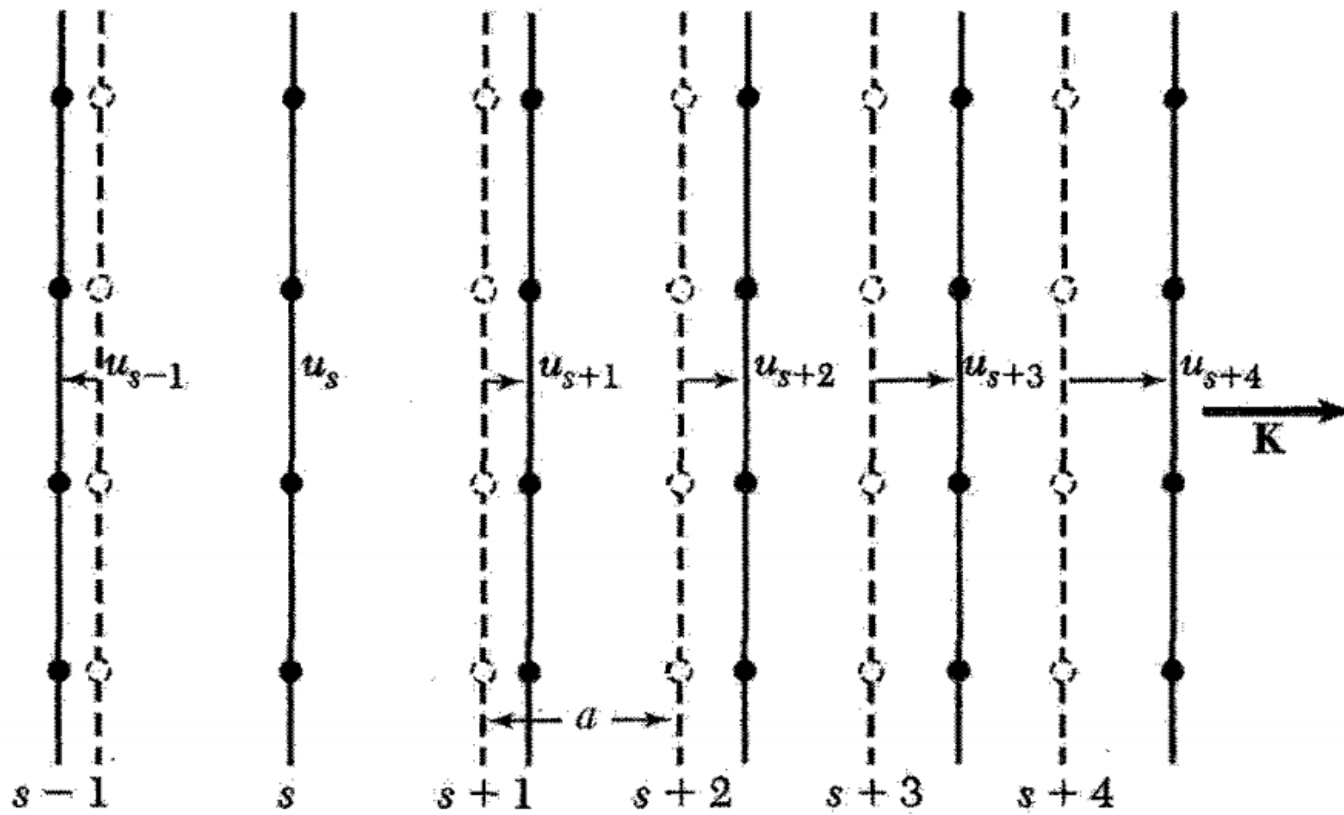
	نام	میدان
	الکترون	—
	فوتون	موج الکترومغناطیسی
	فونون	موج کشسان
	پلاسمون	موج الکترونی جمعی
	مگنون	موج مغناطشی
-	پولارون	الکترون + تغییر شکل کشسان
-	اکسیتون	موج قطبشی

ارتعاشهای بلوری با پایه تک اتمی

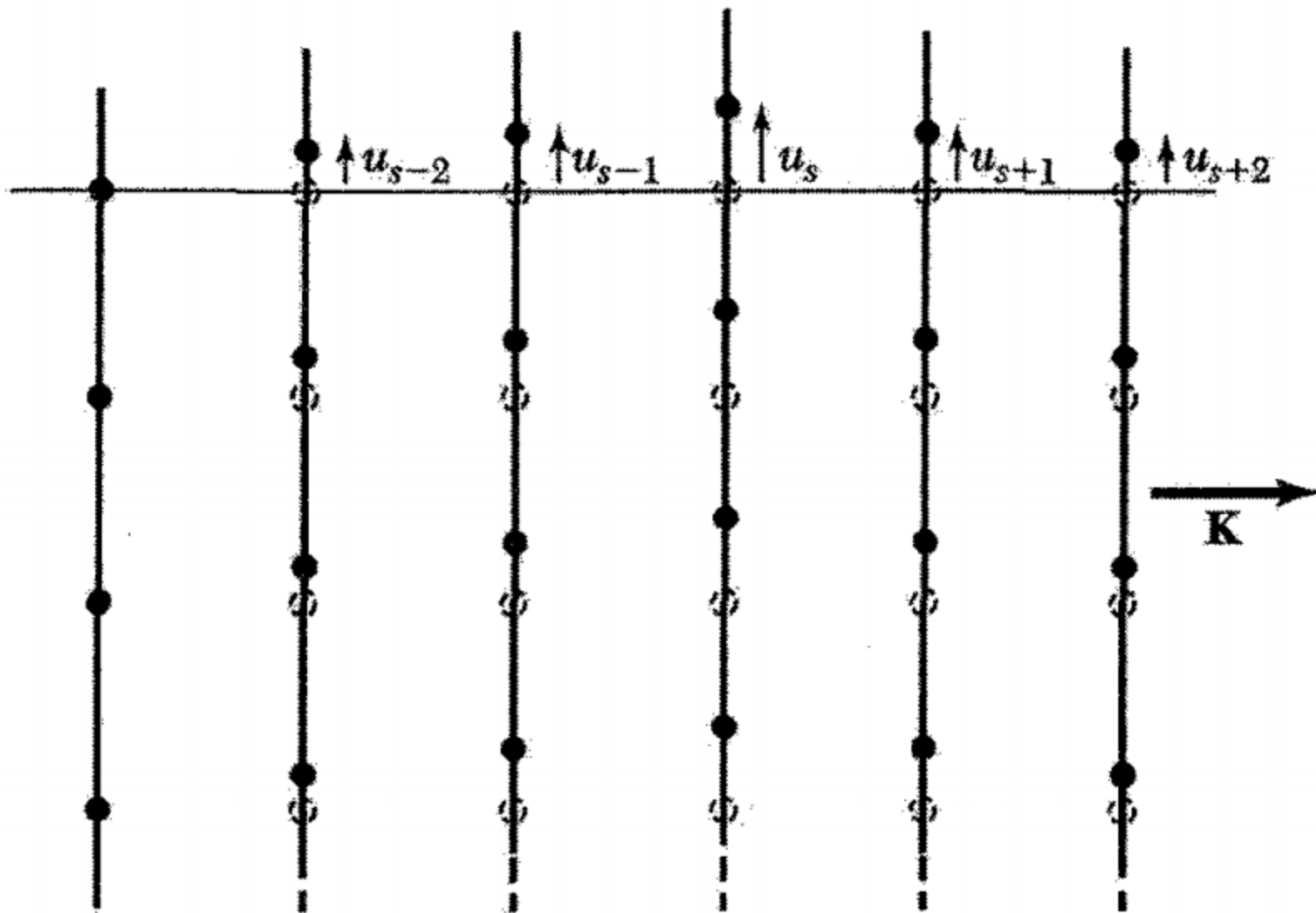
در دو فصل گذشته در مطالعه‌ی ساختارهای بلوری، فرض کردیم که اتم‌ها در مکان‌های شبکه‌ای خود ساکن هستند. ولی در واقع اتم‌ها کاملاً ساکن نیستند، بلکه به واسطه‌ی انرژی گرمایی حول موقعیت تعادل خود نوسان می‌کنند. در این فصل راجع به ارتعاشات شبکه به تفصیل بحث می‌کنیم و تأثیر آن را بر خواص حرارتی، آکوستیکی و نوری بلورها را در این فصل و فصل بعدی بررسی می‌کنیم.

ارتعاشهای کشسان بلوری را که در یاخته‌ی بسیط آن یک اتم وجود دارد، در نظر می‌گیریم. می‌خواهیم بسامد موج کشسان را برحسب بردار موجی که موج را توصیف می‌کند و ثابتهای کشسان پیدا کنیم.

جابه‌جایی صفحه‌ی S از مکان تعادلش را می‌توان با تک‌مختصه‌ی u_s توصیف کرد. در این صورت با یک مسئله‌ی یک‌بعدی روبه‌رویم. برای هر بردار موج سه مد، یکی با قطبش طولی (شکل ۲) و دو تا با قطبش عرضی (شکل ۳)، وجود دارد.



شکل ۲. صفحات اتمی در تعادل (خطوط خط‌چین). جابه‌جایی صفحات اتمی برای موج طولی (خطوط پر).
مختصه u اندازه جابه‌جایی صفحات را نشان می‌دهد.



شکل ۳. صفحات اتمی حین عبور موج عرضی جابه‌جا شده‌اند.

فرض می‌کنیم نیروی وارد بر صفحه S ، ناشی از جابه‌جایی صفحه $s + p$ ، با تفاضل جابه‌جاییهای این دو صفحه، یعنی $u_{s+p} - u_s$ ، متناسب باشد. برای اختصار تنها برهم‌کنشهای نزدیکترین همسایه را، با $p = \pm 1$ ، بررسی می‌کنیم. نیروی کل وارد بر s ناشی از صفحات $s \pm 1$ برابر است با:

$$F_s = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s) \quad (1)$$

این عبارت برحسب جابه‌جاییها خطی و به شکل قانون هوک است.

کمیت C ، ثابت نیرو بین صفحات نزدیکترین همسایه است و برای امواج عرضی و طولی متفاوت است. از اینجا به بعد مناسبتر است فرض کنیم C برای یک اتم از صفحه تعریف شده است، بنابراین F_s نیروی وارد بر یک اتم در صفحه s است.

معادله حرکت اتم در صفحه S عبارت است از

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (2)$$

که در آن M جرم اتم است. در پی پاسخهایی هستیم که در آنها همه جابه‌جاییها دارای وابستگی زمانی $\exp(-i\omega t)$ باشند. در این صورت، $d^2 u_s / dt^2 = -\omega^2 u_s$ و (2) به صورت زیر درمی‌آید:

$$-M\omega^2 u_s = C(u_{s+1} - u_{s-1} - 2u_s) \quad (3)$$

این رابطه یک معادله تفاضلی برحسب جابه‌جاییهای u است، که پاسخهایی به صورت چنین موج متحرکی دارد:

$$u_{s\pm 1} = u \exp(isKa) \exp(\pm iKa) \quad (4)$$

در این رابطه a فاصله بین صفحات و K بردار موج است. اندازه‌ای که برای a به کار می‌رود، به جهت K بستگی دارد.

با رابطه (4) و استفاده از معادله (3):

$$-\omega^2 M u \exp(isKa) = C u \{ \exp[i(s+1)Ka] + \exp[i(s-1)Ka] - 2 \exp(isKa) \} \quad (5)$$

با حذف $u \exp(isKa)$ از دو طرف داریم

$$\omega^2 M = -C [\exp(iKa) + \exp(-iKa) - 2] \quad (6)$$

با استفاده از اتحاد $2 \cos Ka = \exp(iKa) + \exp(-iKa)$ ، رابطه پاشیدگی $\omega(K)$ به دست می‌آید.

$$\omega^2 = (2C/M)(1 - \cos Ka) \quad (7)$$

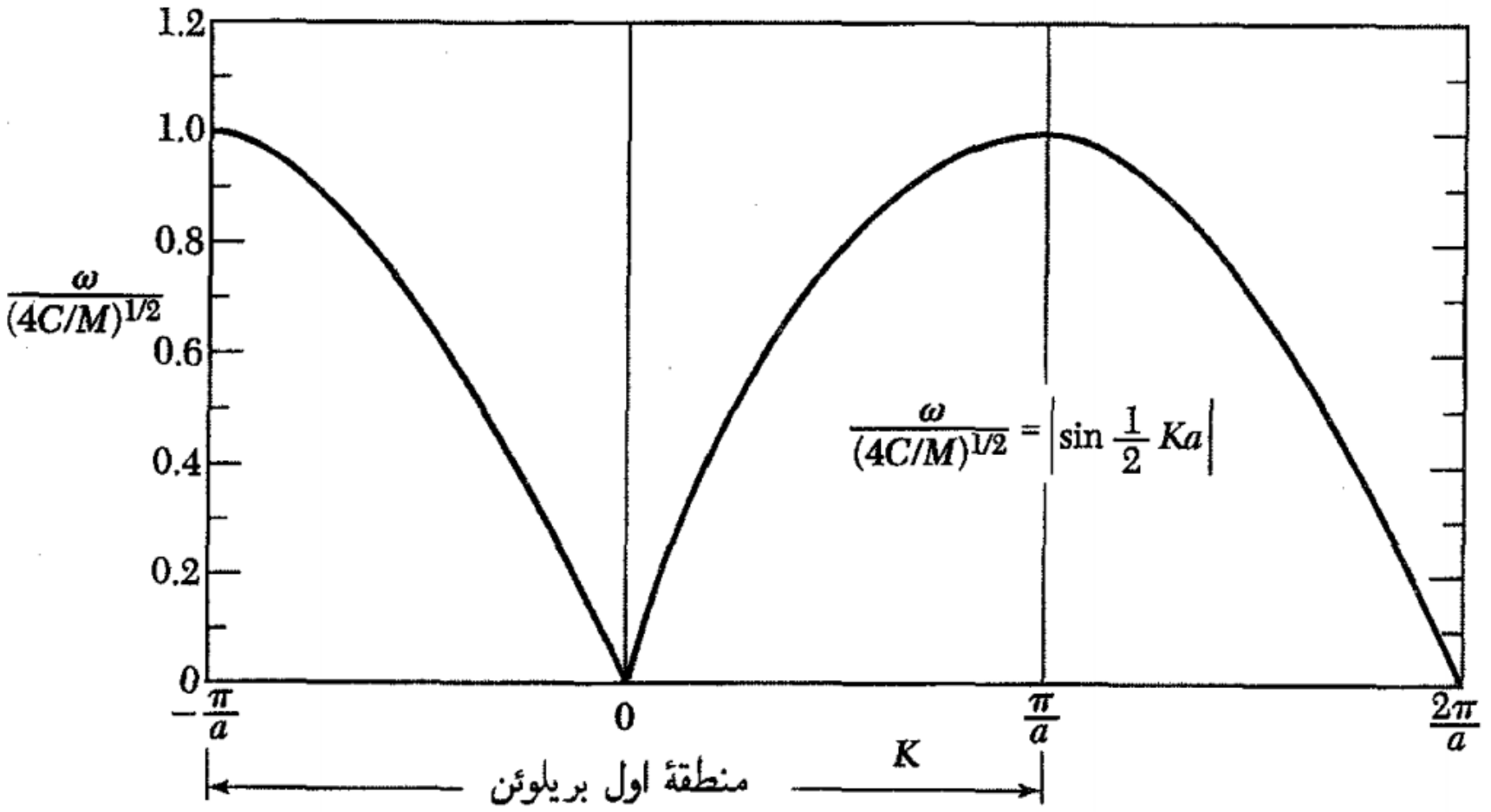
با یک اتحاد مثلثاتی، رابطه (۷) به صورت زیر درمی آید

$$\omega^2 = (4C/M) \sin^2 \frac{1}{2}Ka ; \omega = (4C/M)^{1/2} \left| \sin \frac{1}{2}Ka \right| \quad (9)$$

مرز اولین منطقه بریلوئن در بلور خطی در $K = \pm\pi/a$ قرار دارد. از رابطه (۷) نشان می دهیم که شیب ω بر حسب K در مرز منطقه، $K = \pm\pi/a$ ، صفر است:

$$d\omega / dK = (4C/M)^{1/2} \frac{a}{2} \left| \cos \frac{1}{2}Ka \right|$$

در شکل ۴ نمودار ω بر حسب K ارائه شده است.



شکل ۴. نمودار ω بر حسب K

منطقه اول بریلوئن

برای امواج کشسان چه گستره‌ای از K دارای معنای فیزیکی است؟ فقط آنهایی که در منطقه اول بریلوئن واقع‌اند. نسبت جابه‌جایی‌های دو صفحه متوالی، با استفاده از رابطه (۴)، با رابطه زیر داده می‌شود:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{u \exp[i(s+1)Ka]}{u \exp(isKa)} = \exp(iKa) \quad (10)$$

برای فاز Ka گستره $-\pi$ تا $+\pi$ همه مقادیر مستقل تابع نمایی را به دست می‌دهد.

یکی از دلایل محاسبه نسبت جابجایی‌های دو صفحه متوالی نشان دادن محدوده واقعی K می‌باشد.

گستره مقادیر مستقل K ، به گونه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{یا} \quad -\pi \leq Ka \leq \pi$$

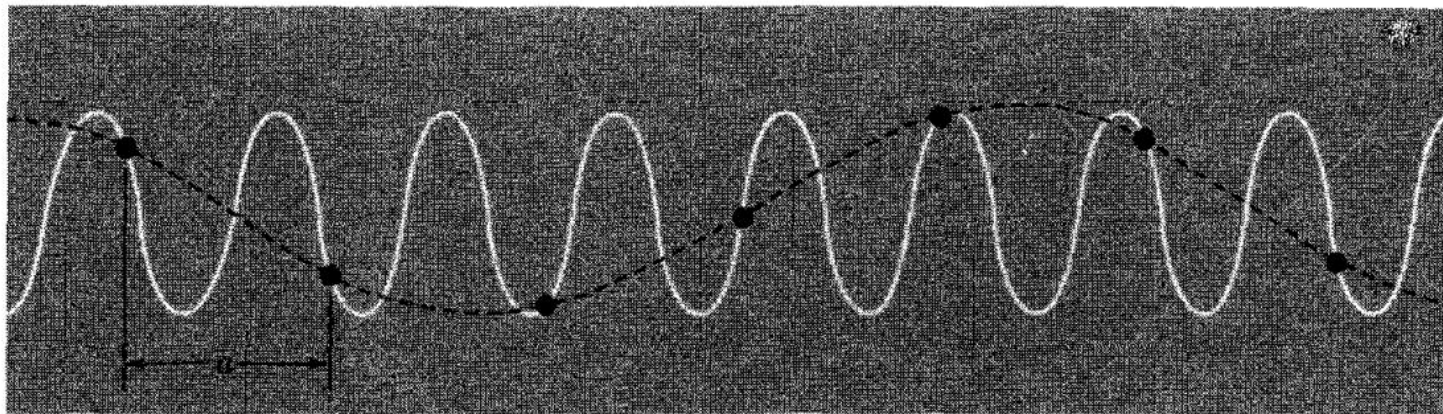
همان‌گونه که در فصل ۲ تعریف شد این گستره، منطقه‌ی اول بریلوئن شبکه‌ی خطی است. مقادیر فرین عبارت‌اند از $K_{\max} = \pm\pi/a$. مقادیر K خارج از منطقه‌ی اول بریلوئن (شکل ۵) صرفاً همان حرکت‌هایی را در شبکه ایجاد می‌کنند که مقادیر داخل حدود $\pm\pi/a$ به وجود می‌آورند.

از یک مقدار K خارج از این حدود می‌توان مضرب درستی از $2\pi/a$ کم کرد و بردار موجی داخل این حدود را به دست آورد. فرض کنید K خارج از منطقه‌ی اول قرار گرفته باشد، ولی بردار موج K' که با

رابطه $K' = K - 2\pi n/a$ (n عدد درستی است) تعریف می‌شود، در درون منطقه اول قرار گیرد. در این صورت، نسبت جابه‌جاییها، رابطه (1^0) ، با توجه به $\exp(i2\pi n) = 1$ به صورت زیر درمی‌آید:

$$u_{s+1}/u_s = \exp(iKa) \equiv \exp[i(K'a + 2\pi n)] \equiv \exp(iK'a)$$

بنابراین همیشه می‌توان جابه‌جایی را با بردار موجی داخل منطقه اول توصیف کرد. خاطر نشان می‌کنیم که $2\pi n/a$ بردار شبکه وارون است، زیرا $2\pi/a$ بردار شبکه وارون است. بنابراین با کم کردن یک بردار شبکه وارون مناسب از K ، همواره یک بردار موج معادل در منطقه اول به دست می‌آید.



شکل ۵. موجی که با منحنی توپر مشخص شده است، هیچ‌گونه اطلاعاتی اضافه بر منحنی خط چین دربر ندارد. فقط طول موجهای بزرگتر از $2a$ برای نمایش حرکت مورد نیاز است.

در روی مرزهای منطقه بریلوئن، $K_{\max} = \pm\pi/a$ ، پاسخ $u_s = u \exp(isKa)$ نمایشگر موج متحرک نیست، بلکه موج ایستاده را نمایش می‌دهد. در مرزهای منطقه خواهیم داشت: $sK_{\max}a = \pm s\pi$ در نتیجه

$$u_s = u \exp(\pm is\pi) = u(-1)^s \quad (12)$$

که موج ایستاده است: آنها به طور یک در میان در فازهای مخالف نوسان می‌کنند، زیرا برحسب اینکه s زوج یا فرد باشد، $u_s = \pm 1$ خواهد بود. این موج به سمت راست یا چپ حرکتی نخواهد داشت.

این وضعیت با بازتاب براگ پرتوهای x معادل است: هنگامی که شرط براگ برآورده شود، موج متحرک نمی‌تواند در شبکه منتشر شود، بلکه در اثر بازتابهای پی‌درپی به عقب و جلو، موج ایستاده به وجود می‌آید.

مقدار بحرانی $K_{\max} = \pm\pi/a$ که در اینجا پیدا کردیم در شرط براگ، $2d \sin \theta = n\lambda$ ، صدق می‌کند: داریم $\theta = \pi/2$ ، $d = a$ ، $K = 2\pi/\lambda$ ، $n = 1$ ، در نتیجه $\lambda = 2a$.

سرعت گروه

سرعت انتشار بسته موج را سرعت گروه می‌نامیم که از این رابطه به دست می‌آید

$$v_g = d\omega/dK \quad \omega = (c/M)^{1/2} \left| \sin \frac{1}{2}Ka \right|$$

یا

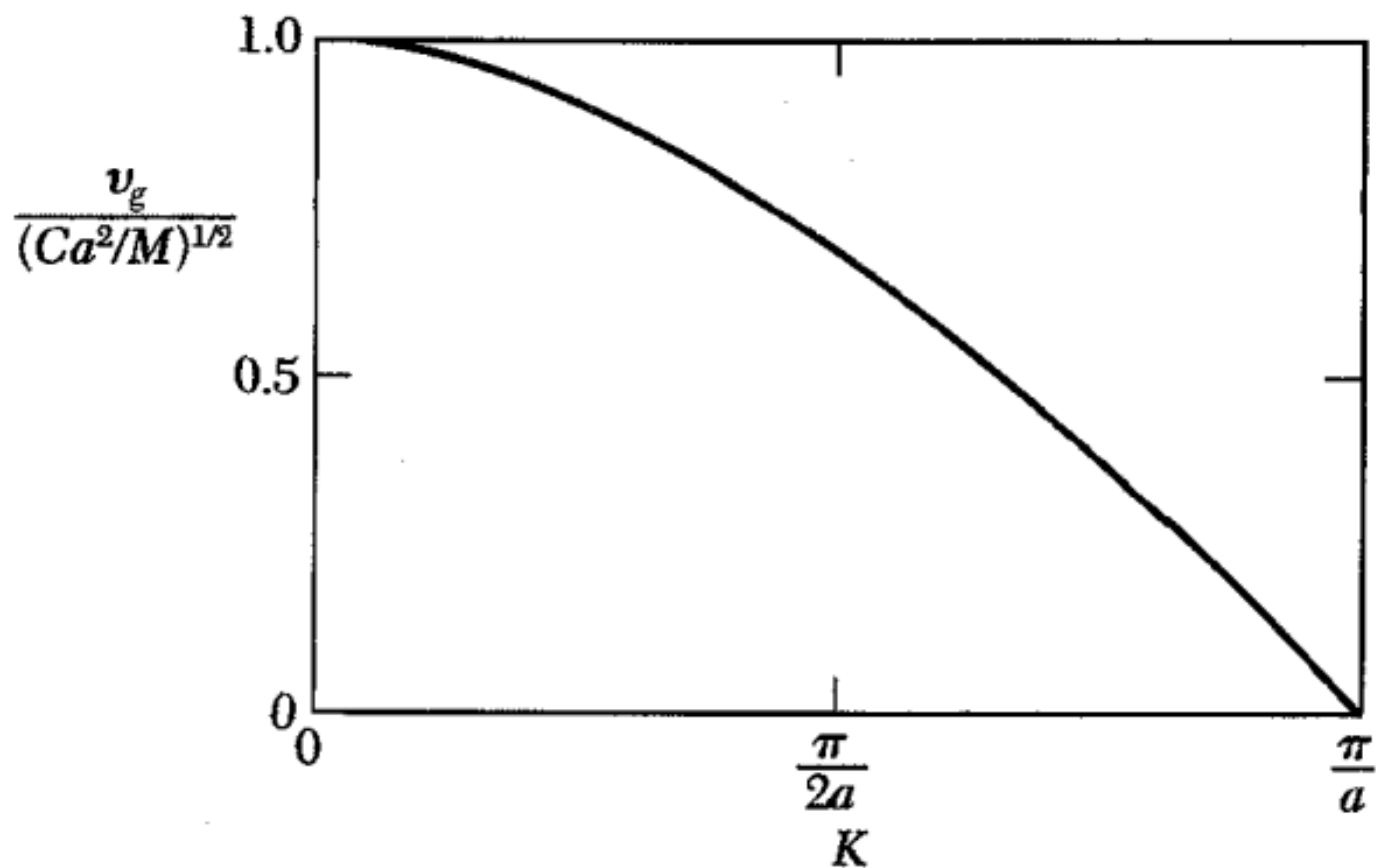
$$\mathbf{v}_g = \text{grad}_{\mathbf{K}} \omega(\mathbf{K}) \quad (13)$$

که گرادیان بسامد نسبت به \mathbf{K} است. سرعت گروه عبارت است از سرعت انتشار انرژی در محیط.

با استفاده از رابطه پاشیدگی خاص رابطه (۹) سرعت گروه (شکل ۶) برابر است با

$$v_g = \left(\frac{Ca^2}{M} \right)^{1/2} \cos \frac{1}{2}Ka \quad (14)$$

که در لبه منطقه، $K = \pi/a$ ، برابر با صفر است. در اینجا موج، مانند (۱۲)، یک موج ایستاده است و انتظار داریم سرعت انتشار در موج ایستاده صفر باشد.

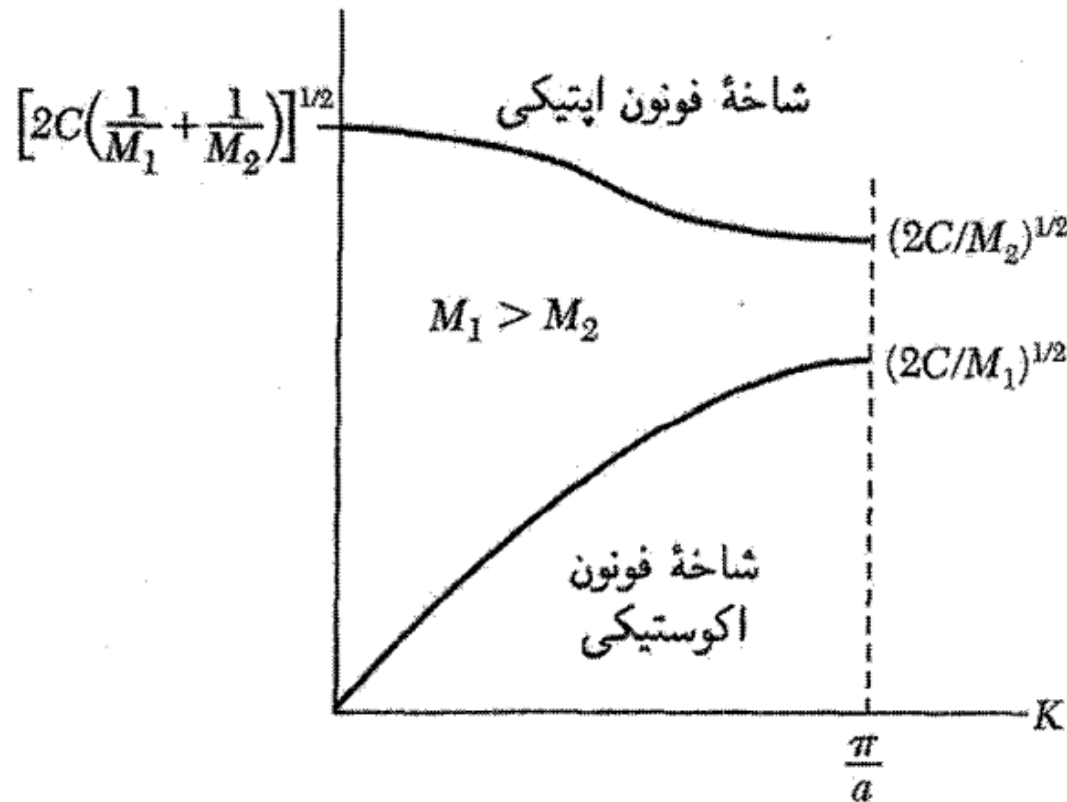


شکل ۶. سرعت گروه v_g بر حسب K ، برای مدل
 شکل ۴. در مرز منطقه، $K = \pi/a$ ، سرعت
 گروه صفر است.

دو اتم در پایه بسیط

در بلورهایی که بیش از یک اتم در یاخته بسیط دارند، رابطه پاشیدگی فونونی ویژگیهای جدیدی را نشان می‌دهد. مورد دو اتم در یاخته بسیط، مانند NaCl یا ساختار الماس، را در نظر می‌گیریم. در یک جهت انتشار معین، رابطه پاشیدگی ω برحسب K برای هر یک از مدهای قطبشی دو شاخه با نامهای اکوستیکی و اپتیکی دارد (شکل ۷). مدهای اکوستیکی طولی LA و اکوستیکی عرضی TA، و مدهای اپتیکی طولی LO و اپتیکی عرضی TO را خواهیم داشت.

اگر p اتم در یاخته بسیط وجود داشته باشد، رابطه پاشیدگی دارای $3p$ شاخه خواهد بود که ۳ تای آنها اکوستیکی و $3 - 3p$ تای دیگر اپتیکی اند.



شکل ۷. شاخه‌های اپتیکی و اکوستیکی رابطه پاشیدگی در شبکه خطی دواتمی. بسامدهای حدی در $K = 0$ و $K = K_{\max} = \pi/a$ نشان داده شده‌اند. ثابت شبکه برابر a است.